一次元Lennard-Jones格子における非線形波動(物性におけるソリトンの統計力学とダイナミックス,科研費研究会報告)

石森, 勇次

一次元 Lennard－Jones 格子における非線形波動

京大・工　　石森勇次

従来のソリトンを中心とした一次元非線形格子の研究は，主として最近接相互作用系に限られてきた。[1] ここでは遠くの粒子の影響も考慮したときの非線形格子について述べる。粒子間ポテンシャルとして（2n，n）Lennard－Jones ポテンシャル

$$U(r) = 4U_0\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{2n} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{n}\right] \tag{1}$$

を用いる。n の値によって遠くの粒子からの影響の度合は違うわけであるが，それによって格子を伝播するソリトンにどのような違いがあるかを調べる。

このポテンシャルで相互作用している粒子系が間隔 a で格子を作るとすれば，全ポテンシャルエネルギーは平衡点のまわりで展開すれば近似的に

$$V = V_0 + \frac{1}{4}\sum_{l}\sum_{l'}\left[U''(|l'-l|a)(u_{l'}-u_l)^2 + \frac{1}{3}U'''(|l'-l|a)(u_{l'}-u_l)^3\right] \tag{2}$$

$$V_0 = \frac{1}{2}\sum_{l}\sum_{l'} U(|l'-l|a) \tag{3}$$

で与えられる。ここで u_l は l 番目の粒子の平衡位置からの変位である。a は条件 $\partial V_0/\partial a = 0$ より

$$a = \left[2\zeta(2n)/\zeta(n)\right]^{1/n}\sigma \tag{4}$$

で与えられる。$\zeta(n)$ は Riemann のツェータ関数である。$n=1$ のとき $a=0$ となり格子は作れないので，$n \geqq 2$ の場合を考える。(2)式より p 番目の粒子に働く力を計算すれば運動方程式は次のようになる。

$$m\frac{d^2u_p}{dt^2} = \sum_{l} U''(|l-p|a)(u_l-u_p) + \frac{1}{2}\sum_{l} U'''(|l-p|a)(u_l-u_p)^2 \tag{5}$$

もし和 $\sum_l$ において最近接のみを取るならば，(5)式はよく知られているように連続体近似のもとでは Boussinesq 方程式になり[1),2)] さらに1方向に伝播する波に着目すると K-dV 方程式に帰着できる。その場合のソリトン解は $\mathrm{sech}^2 x$ タイプである。

和 $\sum_l$ を全て考慮した場合はどうなるか。この時 $\sum_{l'} f_{l'}/(l'-l)^j$ を計算しなければいけないが Fourier 展開の公式を使えば形式的に微分と積分オペレータで表現できる。例えば

$$\sum_{l'}\frac{f_{l'}}{(l'-l)^4} = \left(\frac{\pi^4}{45} + \frac{\pi^2}{6}\frac{\partial^2}{\partial l^2} + \frac{\pi}{6}H\frac{\partial^3}{\partial l^3} - \frac{1}{24}\frac{\partial^4}{\partial l^4}\right)f_l \tag{6}$$

$$H(f_l) = \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_{l'}}{l'-l}\,dl' \tag{7}$$

は

$$f_l = \sum_{k} F_k\, e^{ikl} \tag{8}$$

とおき

$$\sum_{l=1}^{\infty}\frac{\cos lk}{l^4} = \frac{\pi^4}{90} - \frac{\pi^2}{12}k^2 + \frac{\pi}{12}k^2|k| - \frac{1}{48}k^4 \tag{9}$$

を使えば導ける。各 n に対してこれを実行し，さらに長波長近似を行えば次のようになる。但し各量は適当に規格化されている。また $v = u_x$ である。

(n = 2)

$$v_{tt} - v_{xx} + (v^2)_{xx} + H(v_{xxx}) = 0 \tag{10}$$

$$H(v) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{v(x')}{x'-x} dx' \tag{11}$$

ソリトン解 : $v = \dfrac{2(1-\lambda^2)}{(1-\lambda^2)^2(x-\lambda t)^2 + 1}$, $\lambda^2 < 1$ (12)

線形分散関係: $\omega^2 = k^2 + k^2|k|$ (13)

(n = 3)

$$v_{tt} - v_{xx} + (v^2)_{xx} - T(v_{xxxx}) = 0 \tag{14}$$

$$T(v) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{sgn}(x'-x)\left[\log|(x'-x)/\delta| + \gamma\right] v(x')dx' \quad , \quad \gamma : \text{Euler の定数} \tag{15}$$

ソリトン解 : ？

線形分散関係: $\omega^2 = k^2 - k^4 \log \delta k$ (16)

(n ≧ 4)

$$v_{tt} - v_{xx} + (v^2)_{xx} - v_{xxxx} = 0 \tag{17}$$

ソリトン解 : $v = -6K^2 \mathrm{sech}^2[K(x-\lambda t)]$, $\lambda^2 = 1 + 4K^2 > 1$ (18)

線形分散関係: $\omega^2 = k^2 - k^4$ (19)

n が 4 以上であれば (17) 式より最近接系と同じように Boussinesq 方程式で記述される。また n が小さくなると分散性が大きくなり，その結果ソリトン解が指数型から広がった代数型ソリトンになる。(10) 式は一方向に伝播する波に着目すると Benjamin - Ono 方程式[3] に帰着でき，N-ソリトン解も得られている。[4),5)] このソリトンの大きな特徴は Boussinesq (K-dV) ソリトンと違って衝突による位相のずれがないことである。n = 3 の場合は，(10) (17) 式の中間的なものとして興味が持たれるが，(14) 式のソリトン解は，わかっていない。

参考文献

1) M. Toda : Phys. Rept. C 18 (1975) 1
2) 吉田，佐久間 : 1979年春 物理学会予稿集 2a KJ-4
3) H. Ono : J. Phys. Soc. Jpn 39 (1975) 1082
4) Y. Matsuno : J. Phys. A : Math. Gen. 12 (1979) 619
5) J. Satsuma & Y. Ishimori : J. Phys. Soc. Jpn. 46 (1979) 681